

XAFSのバイブル、待望の改訂! XAFSのすべてがわかる。

# XAFSの基礎と応用

日本 XAFS 研究会・編

A5・351 頁・本体 4,600 円 (税別) ISBN 978-4-06-153295-3

2002 年刊行の『X線吸収分光法—XAFS とその応用』

が全面改訂。XAFS の理論・解析法はもちろん、放射光を利用した測定系や時間・空間分解測定、全反射測定、高圧下での測定、その場測定、界面や生体試料を対象とした測定などを詳細に解説。

新刊



## ▶ 主な内容

### 第1章 序論

- 1.1 物質と電磁波の相互作用
- 1.2 X線吸収分光の歴史

### 第2章 XAFS の理論

- 2.1 一回散乱 EXAFS フェルミの黄金律と双極子近似 / EXAFS の主要因 / 付加的な因子 /  $L_3, L_2$  吸収端 EXAFS
- 2.2 多重散乱理論 系の分割 / 表面積分恒等式と角運動量展開 / 恒等式の角運動量展開 / 球関数のサイトシフト演算 / 表面積分の展開による多重散乱方程式の導出 / 多重散乱グリーン関数 / 光学ポテンシャル / Full Potential Multiple Scattering (FPMS) プログラム / XANES への応用 / 補遺 実球面調和関数
- 2.3 XANES の電子状態理論 電子状態理論の概略 / XANES の理論計算 / DFT-LDA, GGA の限界
- 2.4 EXAFS における温度因子 動径分布関数の非対称性とキュムラント展開 / 調和近似のインシュタインモデル / デバイモデル / モースポテンシャルにおけるデバイ・ワラー因子 / 摂動的な非調和振動子におけるデバイ・ワラー因子 / 経路積分法によるデバイ・ワラー因子
- 2.5 おわりに

### 第3章 XAFS の解析

- 3.1 EXAFS の解析 解析の流れ / 位相シフトと後方散乱強度の求め方 / フィッティングの信頼性・誤差 / Ratio 法 / 原子の非対称分布と無秩序の影響 / EXAFS 解析における Q & A
- 3.2 REX を用いた XAFS 解析 EXAFS データの読み込み / EXAFS 振動の抽出 / フーリエ変換 (FT) / カーブフィッティング (CF)
- 3.3 Athena-Artemis を用いた XAFS 解析 Athena / Artemis
- 3.4 XANES 硬 XANES / 軟 XANES / おわりに

### 第4章 XAFS 実験

- 4.1 放射光光源 偏向電磁石からの放射光 / アンジュレータからの放射光 / X線自由電子レーザー
- 4.2 ビームライン光学系 分光素子 / ミラー
- 4.3 基盤技術 透過法 / 蛍光収量法 / 電子収量法
- 4.4 軟 X線技術 軟 X線を利用する際の注意点 / 内殻電子励起とおよびそれに続く過程の分析 / 軟 X線領域における XAFS 測定の例
- 4.5 時間分解 QXAFS 法 / DXAFS 法 / ポンプ・プローブ法
- 4.6 空間分解 微小ビームによる空間分解測定 / ナノビーム集光光学系 / 非走査型イメージング / 深さ分解 XAFS / ラミノグラフィ XAFS
- 4.7 発展的技術 全反射 XAFS / 高圧下の XAFS 測定 / 界面 / 生体試料 / 電気化学的技術 / 触媒の *in situ* 測定

### 第5章 関連手法

- 5.1 軟 X線磁気円二色性、線二色性 理論: 総和則 / 実験方法 / 測定例
- 5.2 硬 X線磁気円二色性 理論: 総和則 / 実験方法 / 測定例
- 5.3 2光子過程を利用した XAFS 測定 理論 / 実験方法 / 測定例
- 5.4 X線異常散乱 AXS 法 / DAFS 法
- 5.5 X線定在波法 理論 / 実験方法および解析法 / 測定例
- 5.6 Core-hole clock 分光法 原理 / 実験方法および解析法 / 測定例
- 5.7 電子エネルギー損失分光法 測定例